2変数の結合のある場合のSCHAの簡単な例

平井, 茂

2変数の結合のある場合のSCHAの簡単な例

住友電工　平　井　　茂

(1985年4月17日受理)

2変数の結合のある場合のセルフコンシステント調和近似の定式化の例として，位相表示されたハミルトニアンで記述される，鎖間相互作用を考えたトランス・ポリアセチレンの基底状態(結合交替)のエネルギーについて考える[1),2)]。 2つの鎖について，電荷部分のみ考える。

$$H=\int \mathrm{d}x\,[A(\nabla\theta_1)^2+CP_1^{\,2}-2gu_1\cos\theta_1+B\cos 2\theta_1$$
$$+A(\nabla\theta_2)^2+CP_2^{\,2}-2gu_2\cos\theta_2+B\cos 2\theta_2$$
$$+V_0\cos(\theta_1-\theta_2)+\frac{2K}{a}(u_1^{\,2}+u_2^{\,2})] \tag{1}$$

$$g>0,\quad B<0,\quad V_0>0$$

$$[\theta_1(x),\ P_1(x')]=[\theta_2(x),\ P_2(x')]=\mathrm{i}\,\delta(x-x')$$

θ_1，θ_2 の古典的な平衡点(i，$j=1,2$)

$$\theta_{is}=\theta_{js}+\pi=2n\pi \qquad u_i=-u_j=u_0 \tag{2}$$

量子的ゆらぎを考える。 $\theta_i=\theta_{is}+\hat{\theta}_i$

$$H=\int \mathrm{d}x\,[A(\nabla\hat{\theta}_1)^2+CP_1^{\,2}-2gu_0\cos\hat{\theta}_1+B\cos 2\hat{\theta}_1$$
$$+A(\nabla\hat{\theta}_2)^2+CP_2^{\,2}-2gu_0\cos\hat{\theta}_2+B\cos 2\hat{\theta}_2$$
$$-V_0\cos(\hat{\theta}_1-\hat{\theta}_2)+\frac{4K}{a}u_0^{\,2}] \tag{3}$$

試行ハミルトニアンH_0として(5)式を考え，ファインマンの不等式(4)を用いて，変分パラメータを決める[3)]。

$$F\leq F_0+\langle H-H_0\rangle\equiv\widetilde{F} \tag{4}$$

（$<\cdots\cdots>$はH_0に関する統計平均）

$$H_0 = \int \mathrm{d}x \,[\, A(\nabla \hat{\theta}_1)^2 + CP_1^{\,2} + \widetilde{B}(\hat{\theta}_1^{\,2} - <\hat{\theta}_1^{\,2}>)$$
$$+ A(\nabla \hat{\theta}_2)^2 + CP_2^{\,2} + \widetilde{B}(\hat{\theta}_2^{\,2} - <\hat{\theta}_2^{\,2}>)$$
$$+ \widetilde{V}(\hat{\theta}_1 \hat{\theta}_2 - <\hat{\theta}_1 \hat{\theta}_2>) + U_0 + \frac{4K}{a} u_0^{\,2} \,] \tag{5}$$
$$= \sum_k \,[\, \widetilde{A}(\hat{\theta}_{1k} \hat{\theta}_{1-k} + \hat{\theta}_{2k} \hat{\theta}_{2-k}) + C(P_{1k} P_{1-k} + P_{2k} P_{2-k})$$
$$+ \widetilde{V}\, \hat{\theta}_{1k} \hat{\theta}_{2-k} \,] + \int \mathrm{d}x \,[\, U_0 + \frac{4K}{a} u_0^{\,2} - \widetilde{B}(<\hat{\theta}_1^{\,2}> + <\hat{\theta}_2^{\,2}>) - \widetilde{V}<\hat{\theta}_1 \hat{\theta}_2> \,]$$

$$\hat{\theta}_i(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k \hat{\theta}_{ik}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \qquad P_i(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k P_{ik}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

$$[\, \hat{\theta}_{ik} ,\, P_{ik'} \,] = \mathrm{i}\,\delta_{k,-k'} \qquad \widetilde{A} = Ak^2 + \widetilde{B} \tag{6}$$

H_0は線形変換Tにより，２つの独立な調和振動子系のハミルトニアンに変換される。

$$\begin{pmatrix} \hat{\psi}_{1k} \\ \hat{\psi}_{2k} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \hat{\theta}_{1k} \\ \hat{\theta}_{2k} \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} Q_{1k} \\ Q_{2k} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} P_{1k} \\ P_{2k} \end{pmatrix}$$

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \qquad [\, \hat{\psi}_{ik} ,\, Q_{ik'} \,] = \mathrm{i}\,\delta_{k,-k'}$$

$$H_0 = \sum_k \,[\, \widetilde{A}_1 \hat{\psi}_{1k} \hat{\psi}_{1-k} + \widetilde{A}_2 \hat{\psi}_{2k} \hat{\psi}_{2-k} + C(Q_{1k} Q_{1-k} + Q_{2k} Q_{2-k}) \,]$$
$$+ \int \mathrm{d}x \,[\, U_0 + \frac{4K}{a} u_0^{\,2} - \widetilde{B}(<\hat{\theta}_1^{\,2}> + <\hat{\theta}_2^{\,2}>) - \widetilde{V}<\hat{\theta}_1 \hat{\theta}_2> \,] \tag{7}$$
$$\widetilde{A}_1 = \widetilde{A} + \frac{\widetilde{V}}{2} \qquad \widetilde{A}_2 = \widetilde{A} - \frac{\widetilde{V}}{2} \tag{8}$$

調和振動子系の性質(9)を用いて，$\widetilde{F}$及び一組のセルフコンシステント方程式を得る。

$$<\hat{\psi}_{ik} \hat{\psi}_{i-k}> = \frac{C}{L} \frac{1}{\omega_i(x)} , \qquad \omega_i(k) = 2\sqrt{\widetilde{A}_i C} \qquad (\text{温度}=0) \tag{9}$$
$$<\cos(\alpha \hat{\theta}_1 - \beta \hat{\theta}_2)> = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\alpha^2<\hat{\theta}_1^{\,2}> + \beta^2<\hat{\theta}_2^{\,2}>)}\, \mathrm{e}^{\alpha\beta<\hat{\theta}_1 \hat{\theta}_2>}$$

$$\widetilde{F}=F_0-2gu_0\,[\,e^{-\frac{\langle\hat{\theta}_1{}^2\rangle}{2}}+e^{-\frac{\langle\hat{\theta}_2{}^2\rangle}{2}}\,]+B\,[\,e^{-2\langle\hat{\theta}_1{}^2\rangle}+e^{-2\langle\hat{\theta}_2{}^2\rangle}\,]$$

$$-V_0\,e^{-\frac{1}{2}(\langle\hat{\theta}_1^2\rangle+\langle\hat{\theta}_2^2\rangle)}\;e^{\langle\hat{\theta}_1\hat{\theta}_2\rangle}-\widetilde{B}\,[\langle\hat{\theta}_1^2\rangle+\langle\hat{\theta}_2^2\rangle]$$

$$-\widetilde{V}\langle\hat{\theta}_1\hat{\theta}_2\rangle \tag{10}$$

$$\langle\hat{\theta}_1^2\rangle=\langle\hat{\theta}_2^2\rangle\equiv\langle\hat{\theta}^2\rangle=\frac{C}{4L}\sum_k\,[\,\frac{1}{\sqrt{C\widetilde{A}_1}}+\frac{1}{\sqrt{C\widetilde{A}_2}}\,]$$

$$=\frac{1}{4\mu}\int dk\,[\,\frac{1}{\sqrt{k^2+k_1^2}}+\frac{1}{\sqrt{k^2+k_2^2}}\;=\frac{-1}{2\mu}\ln x_1x_2\qquad(\,|k|<\frac{\pi}{a}\,)$$

$$\langle\hat{\theta}_1\hat{\theta}_2\rangle=\frac{C}{4L}\sum_k\,[\,\frac{1}{\sqrt{C\widetilde{A}_1}}-\frac{1}{\sqrt{C\widetilde{A}_2}}\,]=\frac{1}{2\mu}\ln\frac{x_2}{x_1} \tag{11}$$

$$k_1^2=\frac{1}{A}(\widetilde{B}+\frac{\widetilde{V}}{2})\qquad\qquad k_2^2=\frac{1}{A}(\widetilde{B}-\frac{\widetilde{V}}{2})$$

$$x_1=\frac{k_1a}{2\pi}\qquad\qquad x_2=\frac{k_2a}{2\pi}\qquad\qquad \mu=2\pi\sqrt{\frac{A}{C}}$$

$$\frac{\partial\widetilde{F}}{\partial\widetilde{B}}=\frac{\partial\widetilde{F}}{\partial\widetilde{V}}=0,\qquad \langle H\rangle=\langle H_0\rangle\quad\text{より}$$

$$\widetilde{B}=gu_0\,e^{-\frac{\langle\hat{\theta}^2\rangle}{2}}-2Be^{-2\langle\hat{\theta}^2\rangle}+\frac{V_0}{2}\,e^{-\langle\hat{\theta}^2\rangle}\,e^{\langle\hat{\theta}_1\hat{\theta}_2\rangle}$$

$$\widetilde{V}=-V_0\,e^{-\langle\hat{\theta}^2\rangle}\,e^{\langle\hat{\theta}_1\hat{\theta}_2\rangle} \tag{12}$$

$$U_0^0=-4gu_0\,e^{-\langle\hat{\theta}^2\rangle/2}+2Be^{-2\langle\hat{\theta}^2\rangle}-V_0\,e^{-\langle\hat{\theta}^2\rangle}\,e^{\langle\hat{\theta}_1\hat{\theta}_2\rangle} \tag{13}$$

(11)，(12) より

$$x_1^2=\frac{a^2}{4\pi^2A}\,[\,gu_0(x_1x_2)^{\frac{1}{4\mu}}-2B(x_1x_2)^{\frac{1}{\mu}}\,] \tag{14}$$

$$x_2^2=\frac{a^2}{4\pi^2A}\,[\,gu_0(x_1x_2)^{\frac{1}{4\mu}}-2B(x_1x_2)^{\frac{1}{\mu}}+V_0\,x_2^{\frac{1}{\mu}}\,]$$

(8), (12), (13), (14) より，系の基底状態のエネルギーは,[4),5)]

$$\frac{E_{gr}}{L}=\frac{1}{2L}\sum_k\left[\omega_1(k)+\omega_2(k)\right]+U_0+\frac{4K}{a}u_0^{\,2}$$

$$-2\widetilde{B}<\hat{\theta}^2>-\widetilde{V}<\hat{\theta}_1\hat{\theta}_2>$$

$$=2\left[\frac{V_F}{4\pi}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2-2gu_0\left(1-\frac{1}{4\mu}\right)(x_1x_2)^{\frac{1}{4\mu}}\right.$$

$$\left.+B\left(1-\frac{1}{\mu}\right)(x_1x_2)^{\frac{1}{\mu}}+\frac{2K}{a}u_0^{\,2}\right]-V_0\left(1-\frac{1}{2\mu}\right)x_2^{\frac{1}{\mu}} \tag{15}$$

(5), (13), (14), (15) を用いて

$$u_0=\frac{ag}{2K}(x_1x_2)^{\frac{1}{4\mu}} \tag{16}$$

$$\frac{E_{gr}}{L}=2\left[\frac{V_F}{4\pi}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2-\frac{4Ku_0^{\,2}}{a}\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{4\mu}\right)+B\left(\frac{2Ku_0^{\,2}}{ag}\right)^4\left(1-\frac{1}{\mu}\right)\right]$$

$$-V_0\left(1-\frac{1}{2\mu}\right)x_2^{\frac{1}{\mu}} \tag{17}$$

簡単のため，$\mu=1$, $B=0$ とし，V_0 を摂動 ($\frac{a^2V_0}{A}\ll 1$) と考え，V_0 の1次をとると

$$x=\left(\frac{a^2gu_0}{4\pi^2A}\right)^{2/3}\qquad u_0=\frac{ag}{2K}x^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{\Delta E_{gr}}{L}\simeq-\frac{1}{2}V_0x=-\frac{ag^2}{16\pi^2K}\frac{a^2V_0}{A}$$

文　　献

1) K. Takano, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 215

2) D. Baeriswyl and K. Maki, Phys. Rev. **B28** (1983) 2068

3) J. Kondo, Physica **123B** (1984) 169

4) T. Nakano and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **50** (1981) 2489

5) S. Inagaki and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 2504